

# 材料科学基础

浙江大学版



# 写在前面

- 本PPT中列出的知识点都很重要
- 红色标出的是特别重要的
- 本PPT作为教案的配合材料，较之教案更为精简



# 第一章 晶体结构

- § 1-1 晶体学基础
- § 1-2 晶体化学基本原理
- § 1-3 典型晶体结构





# § 1-1 晶体学基础



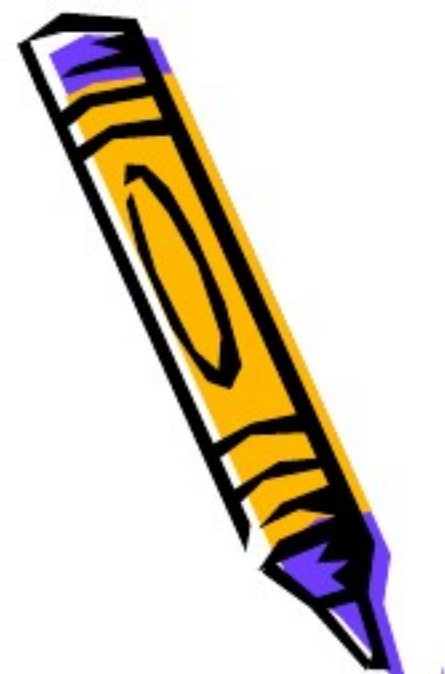
- 材料性能决定因素：内部微观构造。
- 固态材料分类：晶体与非晶体  
要关注二者的区别
- 掌握材料性能，不根据外观，必需从原子排列情况确定





# § 1-1 晶体学基础

## 一、空间点阵



- 空间点阵和晶胞的概念
- 晶胞的描述方法
- 7种晶系、14种布拉菲点阵、晶族的概念
- **关注**晶体结构与空间点阵区别与关联



# § 1-1 晶体学基础

## 二、晶向指数和晶面指数



- 晶向、晶面、晶向指数、晶面指数、晶向族、晶面族的概念
- **关注**六方晶系按两种晶轴系所得指数的转换：  
从(hkil)转换成(hkl)：去掉i即可，反之：加上 $i = -(h+k)$   
[UVW]与[uvw]间互换关系： $U=u-t$ ,  $V=v-t$ ,  
 $W=w$ ;  $u=(2U-V)$ ,  $v=(2V-U)$ ,  $t=-(u+v)$ ,  
 $w=W$





# § 1-1 晶体学基础

## 二、晶向指数和晶面指数

- 晶带与晶带轴的概念

- 关注

1、晶带轴 $[uvw]$ 与该晶带的晶面 $(hkl)$ 之间的关系： $hu+kv+lw=0$

2、任两个不平行晶面的晶带轴： $(h_1k_1l_1)$ 和 $(h_2k_2l_2)$  则有 $u=k_1l_2-k_2l_1$ ,  $v=l_1h_2-l_2h_1$ ,  $w=h_1k_2-h_2k_1$





# § 1-1 晶体学基础

## 二、晶向指数和晶面指数

- 晶面间距的概念、特点

- 关注**晶面间距的计算

正交晶系面间距计算式：

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{h}{a}\right)^2 + \left(\frac{k}{b}\right)^2 + \left(\frac{l}{c}\right)^2}}$$

立方晶系面间距计算式：

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

注意：以上对简单晶胞而言；复杂晶胞应考虑层面增加的影响。如，在体心立方或面心立方晶胞中间有一层，故实际晶面间距应为 $d_{001}/2$ 。





# § 1-1 晶体学基础

## 三、晶体的对称性

- 宏观和微观对称要素、点群、空间群、单形、聚形的概念的概念
- **关注**所有对称要素归纳：

回转对称轴：1、2、3、4、6 $\mu$

对称面：m ( $\bar{2}$ )  $\mu$

对称中心： $\bar{1}$  (2)  $\mu$

回转-反演轴： $\bar{3}$ 、 $\bar{4}$ 、 $\bar{6}$   $\mu$

滑动面：a、b、c、n、d  $\mu$

螺旋轴：2 $_1$ 、3 $_1$ 、3 $_2$ 、4 $_1$ 、4 $_2$ 、4 $_3$ 、6 $_1$ 、6 $_2$ 、6 $_3$ 、6 $_4$ 、6 $_5$   $\mu$



# § 1-2 晶体化学基本原理

## 一、电负性



- 电负性的概念、分界
- 化合物形成与电负性关系：两元素电负性差别很小，键合为非极性共价键或金属键；电负性差别增加，键合极性增加，倾向于离子性键合。  
(纯共价键合)  $\text{Si} \rightarrow \text{MgS} \rightarrow \text{NaCl}$  (离子键合) 两头是极端  
(强极性特征)  $\text{HF} \rightarrow \text{HCl} \rightarrow \text{HBr} \rightarrow \text{HI}$  (弱极性特征)  
大多数实际材料键合特点：几种键合形式同时存在。





# § 1-2 晶体化学基本原理

## 二、晶体中的键型



- 化学键的概念、种类，分子键的概念
- **关注**离子键、共价键、金属键、范式键、氢键的特点、成键方式、强度、形成条件





# § 1-2 晶体化学基本原理

## 三、结合能和结合力



- 原子结合为晶体的原因：原子结合起来后，体系能量降低
- 结合能：分散原子结合成晶体过程中，释放出的能量  $V$
- 原子间的吸引与排斥：吸引是长程力，源自异性电荷库仑引力，远距离时起主要作用；排斥是短程力，源自同性电荷间的库仑力和原子实周围电子气相互重叠引起的排斥，十分接近时起主要作用。





# § 1-2 晶体化学基本原理

## 四、原子半径



- 范德瓦耳斯半径、共价半径、离子半径、金属半径的概念



# § 1-3 典型晶体结构

## 一、金属晶体



- （一）晶体中的原子排列及典型金属晶体结构：最典型结构、堆积特征、密排面、密排面上原子排列方式、晶格常数与原子半径的关系、间隙
- （二）晶体中原子间的间隙：八面体、四面体间隙、配位数、致密度的概念

关注计算





# § 1-3 典型晶体结构

## 二、共价晶体



- 典型结构：单晶硅（金刚石、低于室温时的C、Ge、Sn）结构称金刚石立方结构(骨架状，四原子近邻)； As、Sb、Bi结晶成层状结构(片状，三原子近邻)； S、Se、Te螺旋链结构（两原子近邻键合）
- 成键强度：金刚石结构成键强；层状结构层内强，层间弱；链结构链内共价键，链间分子键





# § 1-3 典型晶体结构

## 二、共价晶体



- 其它重要结构:

闪锌矿和纤锌矿，有极性共价键，是共价晶体的两种典型结构

方石英结构：共价晶体 $\text{SiO}_2$ 的一种变体，  
立方 $\text{ZnS}$ 结构

鳞石英结构：共价晶体 $\text{SiO}_2$ 的一种变体，  
六方 $\text{ZnS}$ 结构





# § 1-3 典型晶体结构

## 三、离子晶体



- 负离子配位多面体：以正离子为中心，将周围最近邻配置的各负离子的中心连起来形成的多面体，负离子配位多面体的形状正离子配位数：配置于正离子周围的负离子数

三者之间  
关系：

表 正、负离子半径比，正离子配位数和配位多面体形之间的关系

$r_-/r_+$	正离子配位数	配位多面体类型	举例
0-0.155	2	线性	$\text{CO}_2$
0.155-0.225	3	三角形	$\text{B}_2\text{O}_3$
0.225-0.414	4	四面体	$\text{SiO}_2$
0.414-0.732	6	八面体	$\text{TiO}_2$
0.732-1.0	8	立方体	$\text{CsCl}$

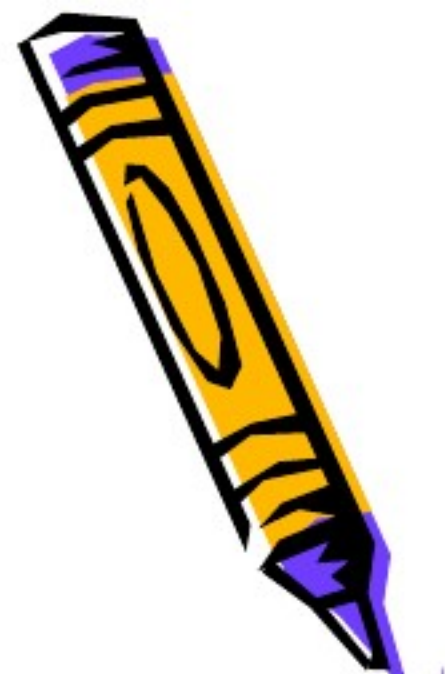
注：这里只是正离子配位数，负离子配位数要由泡林规则计算得到。



# § 1-3 典型晶体结构

## 三、离子晶体

- 形成晶体结构的泡林五规则  
关注用规则分析结构





# § 1-3 典型晶体结构

## 四、硅酸盐晶体



- 硅酸盐矿物结构

关注计算

$$\frac{\sum_{R \neq Si} \sigma_R - N_{OH,F}}{N_{Si}} \geq 4$$

- 岛状硅酸盐:

$$\frac{\sum_{R \neq Si} \sigma_R - N_{OH,F}}{N_{Si}} = 3$$

- 焦硅酸盐:

$$\frac{\sum_{R \neq Si,B} \sigma_R - 3N_B - N_{OH,F}}{N_{Si}} = 2$$

- 环状硅酸盐:

$$\frac{\sum_{R \neq Si, Al(t), B} \sigma_R - 3N_B - N_{OH,F} - N_{Al(t)}}{N_{Si, Al(t)}} = 2$$

- 链状硅酸盐:

$$\frac{\sum_{R \neq Si, Al(t), B} \sigma_R - 3N_B - N_{OH,F} - N_{Al(t)}}{N_{Si, Al(t)}} = 1$$

- 层状硅酸盐:

- 单链与环状的区别: 化学式中单链Si的数量是1或2;  
环状是3以上





# § 1-3 典型晶体结构

## 五、高分子晶体



- (一) 高分子晶体的形成  
基本形态、高分子材料特点、高分子结构单元连接特点、结构形态、结晶特性

### (二) 高分子晶体的形态

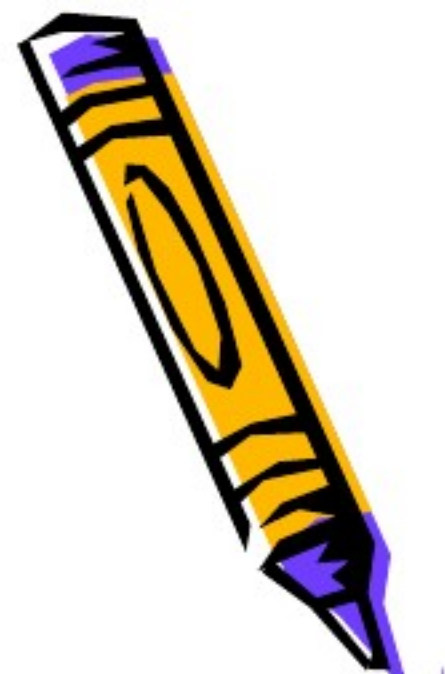
**高分子晶体形貌**：结晶高分子较多地具有球晶的形貌。一个球晶由沿半径垂直方向的多层晶片组成。晶片内是缨束状晶区或折叠链晶区。晶片间是无定形的非晶区偏振光显微镜下聚乙烯球晶





# 第二章 晶体的不完整性

- § 2-1 点缺陷
- § 2-2 位错
- § 2-3 表面、界面结构及不完整性



## 第二章 晶体的不完整性



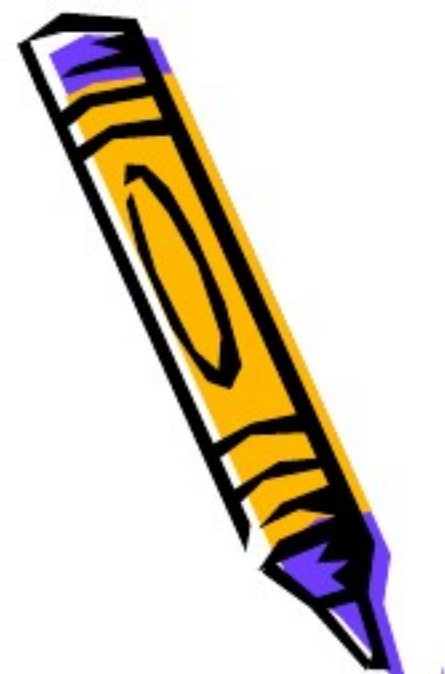
- 缺陷：晶体中偏离完整性的区域，即造成晶体点阵周期势场畸变的一切因素
- 晶体缺陷分类：
  - (1) 点缺陷（零维缺陷）。其特点是在X、Y、Z三个方向上的尺寸都很小(相当于原子的尺寸)；
  - (2) 线缺陷（一维缺陷）。其特点是在两个方向上的尺寸很小，另一个方向上的尺寸相对很长；
  - (3) 面缺陷（二维缺陷）。其特点是在一个方向上的尺寸很小，另外两个方向上的尺寸很大。





# § 2-1 点缺陷

## 一、点缺陷的类型



- (一) 热缺陷

弗伦克尔缺陷：原子离开平衡位置后，挤到格子点的间隙中，形成间隙离子，而原来位置上形成空位，成对产生。

肖特基缺陷：原子获得较大能量，移到表面外新的位置上去，原来位置则形成空位，空位逐渐转移到内部，体积增加。





# § 2-1 点缺陷

## 一、点缺陷的类型

- 在晶体中，几种缺陷可以同时存在，但通常有一种是主要的。一般说，正负离子半径相差不大时，肖特基缺陷是主要的。两种离子半径相差大时弗伦克尔缺陷是主要的。
- (二) 组成缺陷产生和类型





# § 2-1 点缺陷

## 一、点缺陷的类型

- (三) 电荷缺陷  
产生
- (四) 非化学计量结构缺陷  
产生





## § 2-1 点缺陷

### 二、点缺陷的反应与浓度平衡

#### • (一) 热缺陷

肖特基缺陷平衡方程:  $M_M \rightleftharpoons M_M + V_M$  或  $O \rightleftharpoons V_O$

$K_S = [V_M]$ , 因为  $\Delta G_f = -RT \ln K_S$ , 故此  $K_S = [V_M] = \exp\left(-\frac{\Delta G_f}{RT}\right)$ ,

若氧化物 MO 形成肖特基缺陷:

$O \rightleftharpoons V_M'' + V_O^{\bullet\bullet}$ ,  $K_S^{\frac{1}{2}} = [V_M''] = [V_O^{\bullet\bullet}] = \exp\left(-\frac{\Delta G_S}{2kT}\right)$

对 MgO:  $Mg_{Mg} + O_O \rightleftharpoons V_{Mg}'' + V_O^{\bullet\bullet} + Mg_{Mg(\text{表面})} + O_{O(\text{表面})}$

$O \rightleftharpoons V_{Mg}'' + V_O^{\bullet\bullet}$   $K_S = [V_{Mg}''] [V_O^{\bullet\bullet}]$

弗伦克尔缺陷平衡方程:

$M_M = M_i^{\bullet\bullet} + V_M''$ ,  $K_F = \frac{[V_M''] [M_i^{\bullet\bullet}]}{[M_M]} \rightarrow K_F = [V_M''] [M_i^{\bullet\bullet}]$

$K_F^{\frac{1}{2}} = [V_M''] = [M_i^{\bullet\bullet}] = \exp\left(-\frac{\Delta G_F}{2kT}\right)$

对 AgBr:  $Ag_{Ag} + V_i = Ag_i^{\bullet} + V_{Ag}'$ ,  $K_F = \frac{[Ag_i^{\bullet}] [V_{Ag}']}{[Ag_{Ag}] [V_i]}$





## § 2-1 点缺陷

### 二、点缺陷的反应与浓度平衡

- (二) 组成缺陷和电子缺陷
- (三) 非化学计量缺陷与色心，关注计算
  - 1、负离子缺位，金属离子过剩
  - 2、间隙正离子，金属离子过剩
  - 3、间隙负离子，负离子过剩
  - 4、正离子空位，负离子过剩



# § 2-2 位错

## 一、位错的结构类型

- 刃型位错、螺型位错、混合型位错的概念
- **Burgers**回路与位错的结构特征：  
**Burgers**矢量、位错强度、**Burgers**回路概念
- 位错柏格斯矢量的守恒性





# § 2-2 位错

## 一、位错的结构类型

- 位错密度:

在单位体积晶体中所包含的位错线的总长度。

$$\rho = \frac{S}{V}$$



# § 2-2 位错

## 二、位错的应力场



- (一) 位错的应力场

刃型位错：连续弹性介质模型：设一内半径 $r_c$ ，外半径 $R$ 的无限长的空心弹性圆柱，圆柱轴与 $z$ 轴重合。将它沿径向切开至中心，将切面两侧沿 $x$ 轴相对移动一个距离 $b$ ，然后再粘合起来，畸变状态与含正刃型位错晶体相似，可通过它求出刃型位错的应力场





# § 2-2 位错

## 一、位错的结构类型

螺型位错：

连续弹性介质模型：弹性圆柱切开至中心，然后将切面两侧沿 $z$ 轴相对移动 $b$ ，再粘合起来，就得到沿 $z$ 轴的螺型位错模型



# § 2-2 位错

## 二、位错的应力场

- (二) 位错的应变能与线张力

刃型位错、螺型位错、混合型位错应变能的  
计算

- 位错线张力：位错线长度增加一个单位时，晶体能量的增加

直线形位错：T大约等于 $mb^2$

弯曲位错线：正、负位错在远处会部分抵消，系统能量变化小于 $mb^2$ ，常取  $T = \frac{1}{2}\mu b^2$





# § 2-2 位错

## 二、位错的应力场



- (三) 位错核心

位错核心错排严重，不能再简化为连续弹性体。以点阵模型解决

派—纳(Peierls-Nabarro)模型：实际上是不完全的点阵模型。设晶体由被滑移面隔开的两个半块晶体组成。衔接处直接考虑原子间相互作用，内部简化成连续弹性介质。

**派-纳模型中位错的能量组成：两部分。**一是两半晶体中的弹性应变能（主要分布于位错核心之外）；另一是滑移面两侧原子互作用能（错排能）（基本集中于位错核心范围内）





# § 2-2 位错

## 三、位错的运动



- 位错的运动方式:

刃型位错： 滑移： 位错线沿着滑移面移动； 攀移： 位错线垂直于滑移面的移动。

螺型位错： 只作滑移





# § 2-2 位错

## 三、位错的运动



- (一) 位错的滑移  
三类位错的滑移特性
- 位错滑移的驱动力：设想位错受到一种力而运动（实际上位错是一种原子组态，力是作用于晶体中的原子）。使位错发生运动的力。称为位错运动的驱动力。
- 注意：驱动力不必一定是外力，晶体内部质点、界面或其它位错引起的应力



# § 2-2 位错

## 三、位错的运动



- 点阵阻力：源于晶格结构的周期性，滑移面两侧原子之间的相互作用力
- 派-纳应力：派-纳模型，提出了为克服点阵阻力推动位错前进所必须的滑移力和相应的切应力：
$$\tau_p = \frac{2\mu}{(1-\mu)} \exp(-2\pi w/b)$$





# § 2-2 位错

## 三、位错的运动



- (二) 位错攀移

位错攀移特征：与滑移不同，位错攀移时伴随物质迁移，需扩散实现。需要热激活，比滑移需要更大的能量。另外，易在多余半原子面边缘产生曲折

- 单位长度位错线所受的化学攀移力： $F_s = \frac{1}{b^2} kT \ln \frac{C}{C_0}$
- 单位长度位错线所受的弹性攀移驱动力： $F_c = -\frac{b\sigma dy}{dy} = -\sigma b$





## § 2-2 位错

### 四、位错与缺陷的相互作用

- (一) 位错之间的相互作用

1、位错间的弹性相互作用：位错的弹性应力场间发生的干涉和相互作用，将影响到位错的分布和运动

2、位错塞积：许多位错被迫堆积在某种障碍物前，它们来自同一位错源，具相同的柏格斯矢量，障碍物如晶界

3. 位错反应：位错之间的相互转化。譬如一分为二或两合为一， $2b \rightarrow b + b$





## § 2-2 位错

### 四、位错与缺陷的相互作用

- (二) 位错与点缺陷的相互作用

位错与溶质原子的相互作用能

史诺克(Snoek)气团

柯垂耳(Cottrell)气团

电学相互作用

化学相互作用

空位、间隙原子和位错的互相转化



## § 2-2 位错

### 五、位错源与位错增殖

- (一) 位错的来源

位错产生

- (二) 位错的增殖

弗兰克-瑞德(Frank-Read)源

弗兰克-瑞德源需要施加的应力

弗兰克-瑞德源开动的临界应力

双交滑移增殖机构

单点源





# § 2-3 表面、界面结构及不完整性

## 一、晶体的表面

- (一) 表面力场

固体表面力

分子间引力主要来源

- (二) 晶体表面状态

表面能



# § 2-3 表面、界面结构及不完整性

## 一、晶体的表面

- (三) 晶体表面的不均匀性

完美晶格结构的晶体表面：

分成两种类型：

紧密堆积表面：表面平坦，没有波折，所有的原子距离该表面的平行平面的距离都相等

不紧密堆积的表面：即台阶式的表面，表面有波折。





# § 2-3 表面、界面结构及不完整性

## 二、晶界



- (一) 晶界几何

晶界分类：根据位向差( $\theta$ )的不同，晶界分为两类：

- (1) 小角度晶界-两相邻晶粒的位向差约小于 $10^\circ$ ；
- (2) 大角度晶界-两晶粒间的位向差较大，一般大于 $10^\circ$ 以上。

- (二) 小角度晶界

倾侧晶界

位错间距



# § 2-3 表面、界面结构及不完整性

## 二、晶界

不对称倾侧晶界

扭转晶界

一般小角度晶界：旋转轴和界面可任意取向，由刃型和螺型位错组合构成。

晶界能：晶界上原子排列畸变，增高的能量。主要来自位错能量（位错密度又决定于晶粒间的位向差），随位向差增加而增大，仅适用于  $\theta < 15^\circ$ 。式中为常数，A 取决于位错中心的原子错排能





# § 2-3 表面、界面结构及不完整性

## 二、晶界



### (三) 大角度晶界

“重合位置点阵”模型

### (四) 晶界能

晶界能：金属多晶体的晶界一般为大角度晶界，金属大角度晶界能约在 $0.25 \sim 1.0 \text{ J/m}^2$ 范围内，与晶粒之间的位向差无关，大体上为定值。

### (五) 孪晶界



# § 2-3 表面、界面结构及不完 整性

## 二、晶界

- 孪晶面
- 共格孪晶界
- 非共格孪晶界
- 孪晶形成与堆垛层错的关系
- 孪晶面界面能
- (六) 晶界的特性
- 晶界的特性





# 第三章 固溶体

- § 3-1 影响固溶度的因素
- § 3-2 固溶体各论



# 第三章 固溶体

- 固溶体
- 固溶度
- 中间相
- 固溶体分类
- 溶体的有序和无序分类
- 有限和无限固溶体分类





# § 3-1 影响固溶度的因素

## 一、休姆-罗瑟里(Hume-Rothery)规律



- 固溶体固溶度的一般规律：
- 1、尺寸因素：当尺寸因素不利时，固溶度很小；
- 2、化学亲和力：稳定中间相（和组元的化学亲和力有关）会使一次固溶体的固溶度下降（中间相自由能曲线低）；
- 3、电子浓度：电子浓度（价电子数和原子数的比值）影响固溶度和中间相稳定性，
$$\frac{e}{a} = \frac{V(100 - x) + vx}{100}$$
  
（溶质价为v，溶剂价为V）。还有适用于某些合金系的“相对价效应”，即高价元素在低价中的固溶度大





# § 3-1 影响固溶度的因素

## 二、尺寸因素



- 尺寸与溶解度关系
- 维伽定律
- 静位移
- 尺寸因素对固溶度的影响
- 15%规律
- 宽容系数





# § 3-1 影响固溶度的因素

## 三、电价因素

- 电子浓度与溶解度
- 极限电子浓度与晶体结构类型
- 固溶限度与平均族数
- 离子价对固溶体的影响



# § 3-1 影响固溶度的因素

## 四、电负性因素

- 化学亲和力对固溶体溶解度的影响
- 化学亲和力与固溶度
- 达肯经验规律
- 场强与固溶度





# § 3-2 固溶体各论

## 一、置换固溶体

- 三类固溶体的区分方法
- 固溶体的计算确定 **关注**
- 结构相容与置换
- 尺寸因素分析





# § 3-2 固溶体各论

## 二、间隙固溶体



- 间隙固溶体
- 在金属中：溶质元素是半径小于 $1\text{\AA}$ 的一些非金属元素。即氢、硼、碳、氮、氧等
- 间隙形状、大小与溶解度：间隙元素小间隙大，溶解度相对较大，但与具体情况有关。 $\gamma\text{-Fe}$ 中溶入碳原子，八面体间隙 $0.535\text{\AA}$ ，碳 $0.77\text{\AA}$ ，点阵畸变，溶解度受限，( $1148^{\circ}\text{C}$ )仅 $2.11\text{wt}\%$ ，约相当于 $9.2\text{atm}\%$ ； $\alpha\text{-Fe}$ 中，虽四面体间隙大于八面体间隙，但尺寸仍远小于碳，溶解度极小。且测定表明，碳在 $\alpha\text{-Fe}$ 八面体间隙中
- 在无机非金属材料中：可利用的空隙较多。面心立方结构的 $\text{MgO}$ ，四面体空隙可利用； $\text{TiO}_2$ 中还有八面体空隙可利用； $\text{CaF}_2$ 结构中则有配位为八的较大空隙存在





# § 3-2 固溶体各论

## 三、有序固溶体

- (一) 短程有序-微观不均匀性
- 1、无序分布
- 2、偏聚状态
- 3、有序分布
- 短程有序
- “短程序参数”  $\alpha$
- 短程序参数  $\sigma$



# § 3-2 固溶体各论

## 三、有序固溶体



- (二) 长程有序
- 长程有序
- 长程序参数 $\phi$
- 长程序和短程序的不同





## § 3-2 固溶体各论

### 四、固溶体的理论分析与计算

- 固溶体中的缺陷、固溶体的密度及晶格参数 **关注计算**
- 1、生成置换型固溶体时的缺陷反应计算  
(其中 $\alpha$ 为CaO的溶入摩尔数)
- 2、生成填隙型固溶体时的缺陷反应计算  
(其中 $\beta$ 为CaO的溶入摩尔数)



# § 3-2 固溶体各论

## 五、中间相

- 中间相
- 金属中间相特点
- 金属间化合物
- 中间相分类





# § 3-2 固溶体各论

## 五、中间相

- (一) 电子化合物
- 电子相
- (二) 间隙相
- 间隙相
- 间隙相的晶体结构
- (三) 间隙化合物
- 间隙化合物
- 间隙化合物的晶体结构
- 间隙化合物固溶体



# § 3-2 固溶体各论

## 五、中间相



- (四) 拓扑密堆相
- 拓扑密堆相：由两种大小不同的原子构成的一类中间相。大小原子通过适当配合构成空间利用率和配位数都很高的复杂结构，配位数可达12、14、15及16。具有拓扑学特点
- 拓扑密堆相类型：有Cr<sub>3</sub>Si型相(Cr<sub>3</sub>Si、Nb<sub>3</sub>Sn、Nb<sub>3</sub>Sb等)，拉弗斯(Laves)相(MgCu<sub>2</sub>、MgZn<sub>2</sub>、MgNi<sub>2</sub>等)，μ相(Fe<sub>7</sub>W<sub>6</sub>、Fe<sub>7</sub>Mo<sub>6</sub>等)，R相(Cr<sub>18</sub>Mo<sub>31</sub>Co)，P相(Cr<sub>18</sub>Ni<sub>40</sub>Mo<sub>42</sub>)，σ相(FeCr、FeV、FeW、FeMo、CrCo、MoCo、WCo等)等等。





## 第四章 非晶态固体



- 非晶态固体：原子在空间排布没有长程序的固体
- 非晶态固体范畴：玻璃、非晶态金属及非晶态半导体等
- 结构是认识和研究物质的基础，然而，非晶态固体的结构比晶体要复杂得多。



# 第四章 非晶态固体

- § 4-1 非晶态固体的特征与表述
- § 4-2 非晶态半导体
- § 4-3 非晶态金属
- § 4-4 玻璃
- § 4-5 非晶态高分子





# § 4-1 非晶态固体的特征与表述

## 一、非晶态固体的结构特征

- 非晶态固体的微结构
- 无序态的类型
- 双体相关函数



# § 4-1 非晶态固体的特征与表述

## 二、非晶态固体的结构表征函数

- (一) 径向分布函数 **RDF**
- 原子径向分布函数
- 约化径向分布函数
- (二) 结构描述参数
- 结构精确描述参量





# § 4-1 非晶态固体的特征与表述

## 三、非晶态固体的短程序

- 短程序分类
- (一) 化学短程序 (CSRO)
- 化学短程序
- 化学短程序参数
- (二) 几何短程序(GSRO)与局域结构参数
- Voronoi多面体
- Voronoi多面体的指数(Fi)描述
- Voronoi多面体与配位数及局域原子体积 $\Omega$





## § 4-2 非晶态半导体

### 一、非晶半导体的结构模型

- 结构原子间的几何关系定义
- 几何短程有序GSRO
- 几何短程序局域结构参数
- 1.非晶态固体内的流体静压力 $P$
- 2.Von Mises切应力 $\tau$
- 3.与近邻原子的球对称性发生椭圆偏离的度量参数 $\beta$





# § 4-2 非晶态半导体

## 一、非晶半导体的结构模型

- 蚀状组态和交错组态
- 非晶半导体结构模型
- 微晶模型
- 非晶子模型
- 连续无规网络模型(CRN)
- 描述非晶半导体的两类参量：一类是局域原子团，由短程有序参数确定；另一类参量表征局域原子团互连成网络的拓扑特点。



# § 4-2 非晶态半导体

## 二、非晶半导体的微结构

- 硅和锗的结构
- III-V族结构
- 硫系非晶半导体结构
- a-Si:H薄膜结构
- a-Si:H的两相结构模型





# § 4-3 非晶态金属

## 一、非晶态金属和合金的结构模型

- 微晶、非晶团模型及偏离
- 硬球无规密堆模型(DRPHS)
- 局域短程序特征的描述
- Bernal空洞
- Voronoi多面体
- 硬球无规密堆的（仅仅）五种不同Bernal空洞
- 硬球无规密堆模型中的Voronoi多面体



## § 4-3 非晶态金属



### 一、非晶态金属和合金的结构模型

- Gaske11的过渡金属一类金属多面体模型——三棱柱多面体
- 非晶结构中的局域结构单元与晶体的差别
- 非晶体最近邻分布的Voronoi多面体





# § 4-3 非晶态金属

## 二、非晶态金属的微结构

- 非晶态材料的微结构
- 非晶态材料中的局域晶场

### (一) 几何微结构

非晶态金属的几何微结构

非晶态金属中的应力与微结构

### (二) 化学微结构

非晶态金属的化学微结构

### (三) 磁各向异性与微结构



# § 4-4 玻璃

## 一、玻璃结构理论

- (一) 玻璃结构的无规网络学说
- 氧化物玻璃结构
- 形成稳定网络结构满足的四条规则
- 玻璃的无规则网络结构
- 氧化物玻璃中的三种氧化物类型
- (二) 玻璃结构的微晶子学说
- 列别捷夫晶子观点
- 兰德尔微晶学说

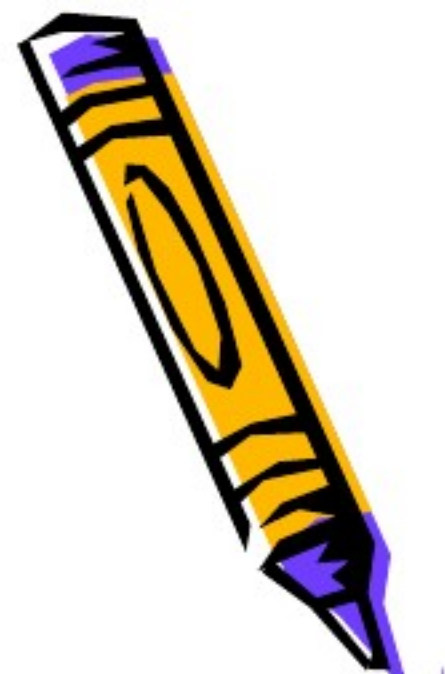




# § 4-4 玻璃

## 一、玻璃结构理论

- 玻璃结构的微晶学说
- 无规则网络学说与微晶学说比较统一看法
- (三) 常见玻璃的微观结构
- 1、硅酸盐玻璃
- 桥氧与网络的关系
- “逆性玻璃”
- 2、硼酸盐玻璃:
- 3、磷酸盐玻璃:



# § 4-4 玻璃

## 二、玻璃的转变



- 转变温度区
- 转变温度范围微观过程
- 转变温度范围附近的结构变化情况
- “假想温度”





# § 4-4 玻璃

## 三、玻璃化的条件

### (一) 热力学与动力学条件

玻璃的不稳（亚稳）性

玻璃的稳定存在

容积分率

玻璃形成能力的判断——三T图

在时间 $t$ 内单位体积的结晶 $V_L/V$

玻璃生成的主要动力学因素



# § 4-4 玻璃

## 三、玻璃化的条件

- (二)结晶化学条件
- 阴离子集团对玻璃形成的影响
- 化学键性质对玻璃的形成的影响
- 化学键强度的影响







## § 4-5 非晶态高分子

### 一、非晶态高分子的结构模型

- (一) 无规线团模型
- 理论基础是高分子溶液理论
- 非晶态高分子无规线团模型
- 高分子的自由体积
- (二) 局部有序模型
- 高分子的两种结构单元
- 粒子相与粒间相的形态



# § 4-5 非晶态高分子

## 二、玻璃化转变



- 玻璃化转变
- 玻璃化转变时的特性变化
- 自由体积理论
- 自由体积与温度及热膨胀的关系
- 高弹态在某温度 $T$ 时的自由体积
- 玻璃态自由体积状态





# 第五章 固体材料中的质点 运动与迁移

- § 5-1 晶格中原子的运动与扩散
- § 5-2 扩散机制及影响扩散的因素



# § 5-1 晶格中原子的运动与扩散

## 一、热缺陷的运动、产生与复合

- 扩散现象的本质
  - 1、通过填隙途径迁移
  - 2、通过空位的机构而迁移





# § 5-1 晶格中原子的运动与扩散

## 二、基本扩散定律——菲克定律



关注计算

- (一) 稳态扩散——菲克第一定律
- (二) 非稳态扩散——菲克第二定律



# § 5-1 晶格中原子的运动与扩散

## 三、扩散系数



- (一) 自扩散系数
- 扩散系数
- 扩散的宏观现象
- 扩散系数与原子迁移的关系
- 迁移频率 $\Gamma$
- 实际扩散系数（对极稀的fcc结构的间隙固溶体）
- 自扩散系数





# § 5-1 晶格中原子的运动与扩散

## 三、扩散系数

- (二)偏扩散系数
- 偏扩散系数
- 偏扩散系数的热力学分析：例如CoO和NiO二元系统的扩散
- (三)交互扩散系数——达肯方程
- 1.克根达尔(Kirkendall)效应
- 2、达肯(Darken)公式



# § 5-2 扩散机制及影响扩散的因素

## 一、扩散机制

- (一) 空位扩散
- 空位扩散机制
- 实现空位扩散的两个条件
- 原子跳动频率 $\Gamma$
- 扩散系数 $D$
- (二) 间隙扩散
- 间隙扩散机制
- 稀薄间隙固溶体间隙原子的扩散系数
- (三) 氧化物中的空位扩散





# § 5-2 扩散机制及影响扩散的因素

## 二、影响扩散的因素

- (一) 温度的影响
- 扩散介质结构的影响
- (三) 扩散物质的影响
- (四) 第三组元的影响
- (五) 位错、晶界和表面的影响
- (六) 外场作用的影响及离子电导



# 第六章 固体材料的晶格振动与电子运动

- § 6-1 晶格振动与热性质
- § 6-2 晶体中的电子运动与能带理论





# § 6-1 晶格振动与热性质

## 一、晶格的振动

- 晶格的振动模式
- 声子
- 声子概念的应用
- (一)一维原子链的振动
- 一维单原子链
- 原子相互作用势
- 简谐近似
- 格波



# § 6-1 晶格振动与热性质

## 一、晶格的振动



- 声学波与光学波的振动与区别
- 一维单原子格子中格波的色散关系
- **计算**一维复式格子的色散关系：可得到方程：

$$\omega_1^2 = \frac{\beta}{mM} \left\{ (m+M) - \left[ m^2 + M^2 + 2mM \cos(2qa) \right]^{\frac{1}{2}} \right\}$$

- - $\omega_2^2 = \frac{\beta}{mM} \left\{ (m+M) + \left[ m^2 + M^2 + 2mM \cos(2qa) \right]^{\frac{1}{2}} \right\}$





# § 6-1 晶格振动与热性质

## 一、晶格的振动

- (二)三维晶格的振动
- 三维晶格与振动
- 色散关系及基本参数
- (三)晶格振动的长波分析
- 纵波和横波
- 长波极限下的声学波
- 弹性波的相速度
- 长波极限下的光学波



# § 6-1 晶格振动与热性质

## 二、晶格振动与热过程

- (一)爱因斯坦和德拜比热理论
- 固体的比热
- 爱因斯坦和德拜模型
- (二)晶格的热膨胀
- 实际晶格的原子振动
- 实际晶格的原子振动微扰处理与热平衡
- 振动与热膨胀





# § 6-1 晶格振动与热性质

## 二、晶格振动与热过程

- (三)晶格的热传导
- 晶格振动与热传导
- $\kappa$ 与温度的关系



# § 6-2 晶体中的电子运动与能带理论

## 一、一维周期场中的电子运动与能带

- 能量与波函数的解
- 禁带
- 布里渊区
- 简约布里渊区 **计算**





# § 6-2 晶体中的电子运动与能带理论

## 二、三维周期场中的电子运动与能带

- 倒格矢
- 三维晶体中的面心立方格子
- 三维和一维情况的区别
- 三维晶体的禁带宽度



# § 6-2 晶体中的电子运动与能带理论

## 三、电子运动的速度与加速度

- 晶体电子的运动(一维运动)速度
- $k$ 状态的电子所贡献电流
- 三维运动时的速度与电流
- 完全自由电子一维运动情形下速度
- 电子的加速度
- 电子的有效质量





# § 6-2 晶体中的电子运动与能带理论

## 四、电子导电与能带模型

- 晶体中的电流
- 能带产生电流与孤立原子的电子关系
- 导体
- 绝缘体
- 半导体

